

UNIVERSIDAD CENTROCCIDENTAL
“LISANDRO ALVARADO”

Decanato de Ciencias y Tecnología
Licenciatura en Ciencias Matemáticas



“ESTUDIO DE UN MÉTODO DE GRADIENTE CONJUGADO
BASADO EN UN PARÁMETRO QUE DEFINE UNA FAMILIA DE
CONJUNTOS DE DIRECCIONES CONJUGADAS.”

TRABAJO ESPECIAL DE GRADO PRESENTADO POR

JOSE WILLIAM MUÑOZ ALVARADO.

COMO REQUISITO FINAL

PARA OBTENER EL TÍTULO DE LICENCIADO

EN CIENCIAS MATEMÁTICAS

ÁREA DE CONOCIMIENTO: OPTIMIZACIÓN.

TUTOR: M.Sc. ALÍ DUIN

Barquisimeto, Venezuela. Junio de 2009



Universidad Centroccidental
 "Lisandro Alvarado"
 Decanato de Ciencias y Tecnología
 Licenciatura en Ciencias Matemáticas



ACTA
 TRABAJO ESPECIAL DE GRADO

Los suscritos miembros del Jurado designado por el Jefe del Departamento de Matemáticas del Decanato de Ciencias y Tecnología de la Universidad Centroccidental "Lisandro Alvarado", para examinar y dictar el veredicto sobre el Trabajo Especial de Grado titulado:

“ESTUDIO DE UN MÉTODO DE GRADIENTE CONJUGADO
 BASADO EN UN PARÁMETRO QUE DEFINE UNA FAMILIA DE
 CONJUNTOS DE DIRECCIONES CONJUGADAS.”

presentado por el ciudadano JOSE WILLIAM MUÑOZ ALVARADO. titular de la Cédula de Identidad No. 14.270.879, con el propósito de cumplir con el requisito académico final para el otorgamiento del título de Licenciado en Ciencias Matemáticas.

Luego de realizada la Defensa y en los términos que imponen los Lineamientos para el Trabajo Especial de Grado de la Licenciatura en Ciencias Matemáticas, se procedió a discutirlo con el interesado habiéndose emitido el veredicto que a continuación se expresa:

¹ _____

Con una calificación de _____ puntos.

En fe de lo expuesto firmamos la presente Acta en la Ciudad de Barquisimeto a los _____ días del mes de _____ de _____.

 TUTOR

 FIRMA

 PRINCIPAL

 FIRMA

 PRINCIPAL

 FIRMA

OBSERVACIONES:

¹ Aprobado ó Reprobado

*A mi madre ...
y mis hermanas que estuvieron allí en las
verdes y en las verdes...*

AGRADECIMIENTOS

De todo corazón quiero agradecerle a las siguientes personas.

A mi madre una persona que sola siempre estuvo ahí para sacarnos sacarme, una persona que con muy poco logró estimular para que cada uno de nosotros fuera lo mejor para ella, dando ejemplo de constancia y de no rendirse ante nada, dando lo mejor de ella para que sus hijos fueran personas exitosas, es grato saber que de tres de sus hijos, los tres ya prácticamente somos profesionales, gracias mamá.

A mi hermana Loryibel por que gracias a ella estoy aquí en esta carrera, y mi hermana Orlays, que son las dos persona a las que mas quiero incluyendo a sus hijos que a un están por llegar, están a un en camino y a todas esas personas que estuvieron dándome su apoyo.

A todos los profesores que me dieron clase y especialmente al profesor Alí Duin quien me recibió sin conocerme y me ayudo con la tesis con mucho empeño en su trabajo, a su esposa y a su hijo, también a la profesora María Luisa y a la profesora Yenny Salazar .

Y también todos aquellos compañeros que tuve durante todo el periodo de permanencia que tuve como estudiante en la universidad algunos como Iris, Jhon, Yovera, Ramón, Teodoro, Julio y muchos más.

Gracias a todas estas personas muchas gracias por estar allí.

RESUMEN

Los métodos de gradiente conjugado son una clase de métodos importantes en optimización sin restricciones, especialmente cuando la dimensión es grande.

Este trabajo describe el artículo de Y.-H. Dai¹ and L.-Z. Liao² ver en [13] donde se propone una nueva condición de conjugancia la cual considera un esquema de línea de búsqueda inexacta pero se reduce a la condición tradicional de conjugancia si la línea de búsqueda es exacta. Basado en la nueva condición de conjugancia se construyen dos nuevas variantes del método de gradiente conjugado no lineal. Se proporciona un análisis de convergencia para los dos métodos. Los resultados numéricos muestran que uno de los métodos es más eficiente para los tests de los problemas de prueba utilizados por Dai y Liao en [13].

Los resultados presentados no son originales sino una interpretación llevada a un nivel de detalle mayor que la presentada en [13].

ÍNDICE

Agradecimientos	i
Resumen	iii
Introducción	1
1. Preliminares	3
2. Nueva condición de conjugancia y su fórmula resultante para β_k	9
3. Análisis de convergencia	17
4. Resultados numéricos	29
5. Código y funciones de prueba	33
6. Conclusiones y recomendaciones	45
Referencias Bibliográficas	47

INTRODUCCIÓN

Según Nocedal [5] el método de gradiente conjugado es uno de las técnicas más útiles para la solución de sistemas de ecuaciones lineales grandes, y también puede ser adaptado para resolver problemas de optimización no lineal.

El método gradiente conjugado lineal fue propuesto por Hestenes y Stiefel en el 1950 como un método iterativo para resolver sistemas lineales con matriz de coeficiente positiva definida . Es una alternativa a la eliminación de Gauss que es muy apropiada para la solución de problemas grandes.

El primer método de gradiente conjugado no lineal fue presentado por Fletcher y Reeves en el decenio de 1960. Es una de las primeras técnicas conocidas de solución de problemas de optimización no lineal a gran escala. A lo largo de los años, muchas variantes de este esquema original se han propuesto, y algunas son ampliamente utilizadas en la práctica. Las características principales de estos algoritmos son que no requieren el almacenamiento de matriz y son más rápidos que el método de descenso más rápido.

El objetivo principal que se propusieron Dai y Liao (ver [13]) en su trabajo era encontrar un método gradiente conjugado nuevo y eficiente con la dirección de búsqueda d_k , teniendo la simple forma (1.3). Para este propósito se propone una nueva condición de conjugancia, la cual considera un esquema de linea de búsqueda inexacta, pero se reduce a la condición (1.9) si la linea de búsqueda es exacta. Basado sobre la nueva condición de conjugancias, se propone dos nuevos métodos de gradiente conjugado no lineal, el análisis de convergencias es presentado en el capítulo 3 y los resultados numéricos reportado por Dai y Liao en el último capítulo.

El trabajo propio es el desarrollo de las demostraciones a detalle, se da la forma explícita del algoritmo y se construyen el programa para realizar las pruebas a algunas de las funciones expuestas en [13]. Los resultados numéricos y otras funciones que fueron construidas y se verificar la convergencia del método de gradiente conjugado que fueron dadas en el paper de Dai y Liao, y el anterior método de gradiente conjugado dado por Hestenes y Stiefel.

CAPÍTULO 1

PRELIMINARES

El algoritmo propuesto por Dai y Liao en [13] es una variante de los métodos de gradiente conjugado, los cuales están diseñados en general, o bien para resolver sistemas de ecuaciones o bien para resolver problemas de optimización sin restricciones. En este estudio el problema abordado es el de minimizar una función de n variables.

$$\text{mín } f(x), \quad x \in \mathbb{R}^n. \quad (1.1)$$

Donde f es suave y su gradiente está disponible. El método gradiente conjugado es muy usado para resolver (1.1) especialmente cuando n es grande. Una iteración del método tiene la siguiente forma:

$$x_{k+1} = x_k + \alpha_k d_k \quad (1.2)$$

$$d_k = \begin{cases} -g_k & \text{si } k = 1 \\ -g_k + \beta_k d_{k-1} & \text{si } k > 1 \end{cases} \quad (1.3)$$

Donde $\alpha_k > 0$ es una longitud de paso, β_k es un escalar, y g_k denota $\nabla f(x_k)$. En el caso cuando f es una función cuadrática convexa,

$$f(x) = g^t x + \frac{1}{2} x^t H x, \quad (1.4)$$

y donde α_k es el minimizador unidimensional a lo largo de d_k , i.e.,

$$\alpha_k = \arg \text{mín}_{\alpha > 0} f(x_k + \alpha d_k). \quad (1.5)$$

El método de gradiente conjugado genera un conjunto de direcciones de descenso $\{d_k \in \mathbb{R}^n : k = 1, \dots, n\}$ tales que la condición de conjugancia se cumple para estas

direcciones, es decir;

$$d_i^T H d_j = 0 \quad \forall i \neq j. \quad (1.6)$$

Denote y_{k-1} a ser la diferencia de los gradientes,

$$y_{k-1} = g_k - g_{k-1}. \quad (1.7)$$

En general, para funciones no lineales diferenciable, se conoce por el teorema de valor medio que existe un $t \in (0, 1)$ tales que para $x_k, x_{k-1} \in \mathbb{R}^n$

$$\alpha_{k-1}^{-1} d_k^T y_{k-1} = d_k^T \nabla^2 f(x_{k-1} + t\alpha_{k-1} d_{k-1}) d_{k-1} \quad (1.8)$$

En efecto:

Por teorema de valor medio se tiene que

$$\nabla^2 f(x_{k-1} + t(x_k - x_{k-1}))(x_k - x_{k-1}) = \nabla f_k - \nabla f_{k-1} = y_{k-1}, \quad \text{para algun } t \in (0, 1).$$

Donde f es dos veces diferenciable y dado que $x_k - x_{k-1} = \alpha_{k-1} d_{k-1}$ se tiene que

$$\nabla^2 f(x_{k-1} + t(x_k - x_{k-1})) \alpha_{k-1} d_{k-1} = y_{k-1}$$

multiplicando por d_k^T y α_{k-1}^{-1} en ambos miembros se tiene que

$$\alpha_{k-1}^{-1} d_k^T y_{k-1} = d_k^T \nabla^2 f(x_{k-1} + t(x_k - x_{k-1})) d_{k-1}$$

Por lo tanto es razonable reemplazar (1.6) por la siguiente condición de conjugancia:

$$d_k^T y_{k-1} = 0 \quad (1.9)$$

Multiplicando por y_{k-1} en (1.3) y usando (1.9) se deduce una fórmula para el escalar β_k es decir:

$$\begin{aligned} d_k^T y_{k-1} = (-g_k + \beta_k d_{k-1})^T y_{k-1} &\implies -g_k^T y_{k-1} + \beta_k d_{k-1}^T y_{k-1} = 0 \\ &\implies \beta_k = \frac{g_k^T y_{k-1}}{d_{k-1}^T y_{k-1}} \\ \beta_k^{HS} &= \frac{g_k^T y_{k-1}}{d_{k-1}^T y_{k-1}} \end{aligned} \quad (1.10)$$

A esta fórmula se le conoce como HS la cual fue deducida por Hestenes y Stiefel en [4]. De cualquier modo ambas condiciones de conjugancias (1.6) y (1.9) dependen de línea de búsqueda exactas.

Veáse que dada una función

$$f(x) = \frac{1}{2}x^t Ax + b^t x.$$

Donde A es una matriz simétrica y definida positiva, se tiene que su gradiente viene dado por

$$\nabla f(x) = Ax + b = g(x).$$

El algoritmo del método de gradiente conjugado es el siguiente:

De $x_1(en R^n)$, $k = 1$, $g_1 = \nabla f(x_1)$, $d_1 = -g_1$,
while $\frac{f(x_k) - f(x_{k+1})}{1 + |f(x_k)|} \leq 10^{-16}$
 $\alpha_k = arg \min_{\alpha \geq 0} \{f(x_k + \alpha d_k)\}$
 $x_{k+1} = x_k + \alpha_k d_k$, $s_k = \alpha_k d_k$
 $g_{k+1} = \nabla f(x_{k+1})$, $y_k = g_{k+1} - g_k$
 $\beta_{k+1} = \max \left\{ \frac{g_{k+1}^T y_k}{d_k^T y_k}, 0 \right\} - t \frac{g_{k+1}^T s_k}{d_k^T y_k}$
 $d_{k+1} = -g_{k+1} + \beta_{k+1} d_k$
 $k = k + 1$

end while

devuelva (x_k)

En la práctica de computación normalmente se hace búsqueda lineal inexacta en vez de búsqueda lineal exacta. En el caso cuando $g_{k+1}^T d_k \neq 0$, la condición de conjugancia (1.6) y (1.9) pueden tener alguna desventaja (ver [12]). Supóngase que se minimiza la función cuadrática convexa (1.4) sobre un sub-espacio generado por un conjunto de direcciones conjugadas mutuamente d_1, \dots, d_k . Suponga que la búsqueda lineal a lo largo de d_1 no es exacta, esto es, $\alpha_1 \neq \alpha_1^*$ donde α_1^* es la longitud de paso que resuelve (1.5). Entonces no importa que búsqueda lineal es usada en la sub-sucesión de iteraciones, siempre se tiene que

$$(x_{k+1} - x_k^*)^T H(x_{k+1} - x_k^*) \geq (\alpha_1 - \alpha_1^*)^2 d_1^T H d_1 \quad (1.11)$$

Donde $x^* = -H^{-1}g$ es el mínimo de la función objetivo (1.4). Por lo tanto se verá que el error en el lado izquierdo en la actual iteración no puede ser eliminado en las

posteriores iteraciones mientras que las direcciones de búsqueda posterior sean conjugadas a la dirección de búsqueda actual.

En [7] Nazareth se desarrolla un algoritmo de recurrencia de tres términos (TTR) en el cual la búsqueda de dirección es de la forma

$$d_{k+1} = -y_k + \frac{y_k^T y_k}{d_k^T y_k} d_k + \frac{y_{k-1}^T y_k}{d_{k-1}^T y_{k-1}} d_{k-1}. \quad (1.12)$$

Para funciones cuadráticas convexas, la búsqueda de direcciones generada por el algoritmo TTR son mutuamente conjugadas incluso cuando las búsquedas lineales son inexactas o la dirección inicial no es a lo largo del opuesto del gradiente. Después de n iteraciones, el algoritmo implementa una búsqueda lineal a lo largo del vector

$$-\sum_{k=1}^n \frac{g_{k+1}^T d_k}{y_k^T d_k} \alpha_k d_k \quad (1.13)$$

con la longitud de paso inicial igual a uno, y por ende la terminación cuadrática finita se mantiene. De cualquier modo a pesar de los avances teóricos sobre problemas cuadráticos, el algoritmo TTR no ha probado ser significativamente superior al PRP. Una posible razón es que si f es muy no lineal sobre dimensión n grande entonces los coeficientes $\left(\frac{g_{k+1}^T d_k}{y_k^T d_k}\right)$ en (1.13) las cuales son calculados en n iteraciones previas e intentan aproximar la información de un segundo orden, no proporciona información exacta.

En [11] Yuan and Stoer considera la dirección de búsqueda de la forma

$$d_k = \mu_k g_k + \nu_k d_{k-1} \quad (1.14)$$

y calcula los escalares μ_k y ν_k por minimización y aproximación de modelos cuadráticos en sub espacio dimensión dos expandido por el gradiente actual y la dirección de búsqueda anterior:

$$\min_{d \in \Omega_k} \varphi_k(d) = g_k^T d + \frac{1}{2} d^T H_k d, \quad (1.15)$$

Donde $\Omega_k = \text{span}\{g_k, d_{k-1}\}$. Entonces por aproximación H_k completamente memory-less BFGS actualización de la matriz o la estimación de la cantidad adecuada $g_k^T H_k g_k$ ellos obtienen resultados numéricos satisfactorios.

CAPÍTULO 2

NUEVA CONDICIÓN DE CONJUGANCIA Y SU FÓRMULA RESULTANTE PARA β_k

La idea es originada principalmente de la siguiente observación: para muchos métodos de optimización sin restricciones incluido los métodos quasi-Newton, el método memoryless BFGS y el método limited memory BFGS, la dirección de búsqueda puede ser escrita de la forma

$$d_k = -B_k g_k, \quad (2.1)$$

donde B_k es alguna matriz $n \times n$ simétrica y definda positiva que satisface la ecuacion quasi-Newton:

$$B_k y_{k-1} = s_{k-1}, \quad (2.2)$$

donde $s_{k-1} = \alpha_{k-1} d_{k-1}$ es el paso. Por (2.1) y (2.2), se tiene que

$$d_k^T y_{k-1} = -(B_k g_k)^T y_{k-1} = -g_k^T B_k y_{k-1} = -g_k^T s_{k-1}. \quad (2.3)$$

La relación anterior implica que (1.9) se tiene si línea de búsqueda es exacta entonces en este caso $g_k^T s_{k-1} = 0$. De cualquier modo los algoritmos numéricos en las practicas numéricas normalmente adoptan una línea de búsqueda inexacta en lugar de línea de búsqueda exacta. Por esta razón, parece mas razonable reemplazar la conjugancia (1.9) con la condición

$$d_k^T y_{k-1} = -t g_k^T s_{k-1}, \quad (2.4)$$

donde $t \geq 0$ es un escalar.

Para garantizar que la direccion de búsqueda en (1.3) satisface la condición de conjugancia (2.4) sólo se necesita multiplicar (1.3) por y_{k-1} y usar (2.4).

$$\begin{aligned} (d_k = -g_k + \beta_k d_{k-1})^T y_{k-1} &\implies d_k^T y_{k-1} = -g_k^T y_{k-1} + \beta_k d_{k-1}^T y_{k-1} = -t g_k^T s_{k-1} \\ &\implies \beta_k = \frac{g_k^T y_{k-1}}{d_{k-1}^T y_{k-1}} - \frac{t g_k^T s_{k-1}}{d_{k-1}^T y_{k-1}} \end{aligned}$$

Obteniendo

$$\beta_k = \frac{g_k^T(y_{k-1} - ts_{k-1})}{d_{k-1}^T y_{k-1}} \quad (2.5)$$

es obvio que

$$\beta_k = \beta_k^{HS} - t \frac{g_k^T s_{k-1}}{d_{k-1}^T y_{k-1}}. \quad (2.6)$$

A partir de la cual se ve que la fórmula (2.5) con $t \in [0, +\infty)$ real mente define una clase o familia de métodos de gradiente conjugado no linial. Por simplicidad se llamará al método definido por (1.2) - (1.3) con β_k obtenida de (2.5), método (2.5). Note que si $d_{k-1}^T y_{k-1} > 0$, lo cual es requerido por línea de búsqueda de wolfe (fuerte), tenemos que $\beta_k g_k^T d_{k-1} \leq \beta_k^{HS} g_k^T d_{k-1}$ veamos por que dado que si $d_{k-1}^T y_{k-1} > 0$ se tiene $\beta_k = \beta_k^{HS} - t \frac{g_k^T s_{k-1}}{d_{k-1}^T y_{k-1}}$ donde $g_k^T s_{k-1} < 0$ dado que $g_k^T d_{k-1} < 0$ con lo que el segundo cociente multiplicado por el menos es positivo así, si le quitamos este cociente nos queda $\beta_k \geq \beta_k^{HS} \implies \beta_k g_k^T d_{k-1} \leq \beta_k^{HS} g_k^T d_{k-1}$.

Por (2.3), es razonable que el valor de t en (2.5) sea

$$t = 1. \quad (2.7)$$

En este caso, se sigue de (2.5) que

$$\beta_k = \frac{g_k^T(y_{k-1} - s_{k-1})}{d_{k-1}^T y_{k-1}}. \quad (2.8)$$

Similarmente se llamará al método definido por (1.2) - (1.3) con β_k obtenida de (2.8) método (2.8). Una propiedad notable de la fórmula (2.8) es que esta es solución del siguiente modelo cuadrático uniparametro sobre β .

$$\arg \min_{\beta} g_k^T d(\beta) + \frac{1}{2} d(\beta)^T H_K d(\beta), \quad (2.9)$$

donde

$$d(\beta) = -g_k + \beta d_{k-1} \quad (2.10)$$

y la matriz $H_k = B_k$ es tal que $H_k s_{k-1} = y_{k-1}$. Para cualquier $t \geq 0$, d_k y \bar{d}_k serán las direcciones de búsqueda dada por (2.5) y el Método de HS, respectivamente, es decir:

$$d_k = -g_k + \beta_k d_{k-1} \quad (2.11)$$

y

$$\bar{d}_k = -g_k + \beta_k^{HS} d_{k-1}. \quad (2.12)$$

Asuma que $g_k^T \bar{d}_k < 0$. Entonces por (2.11), (2.12), (2.6), y $d_{k-1}^T y_{k-1} > 0$, se tiene $g_k^T d_k < 0$. Se probará la afirmación anterior.

Prueba:

$$\begin{aligned} g_k^T d_k &= g_k^T (-g_k + \beta_k d_{k-1}) \\ &= g_k^T \left(-g_k + \left(\beta_k^{HS} - t \frac{g_k^T s_{k-1}}{d_{k-1}^T y_{k-1}} \right) d_{k-1} \right) \\ &= g_k^T \left(-g_k + \beta_k^{HS} d_{k-1} - t \frac{g_k^T s_{k-1}}{d_{k-1}^T y_{k-1}} d_{k-1} \right) \\ &= g_k^T \bar{d}_{k-1} - t \frac{g_k^T g_k^T \alpha_{k-1} d_{k-1} d_{k-1}}{d_{k-1}^T y_{k-1}} \\ &= g_k^T \bar{d}_{k-1} - t \alpha_{k-1} \frac{g_k^T d_{k-1} g_k^T d_{k-1}}{d_{k-1}^T y_{k-1}} \end{aligned}$$

Como el cociente es positivo pues tanto el numerador, denominador, alfa, y t son positivos al ser multiplicado por el menos pasa a ser negativo, por lo tanto la suma es negativa obteniendo el resultado requerido.

Así, si la dirección generada por el método HS es de descenso y si la línea de búsqueda proporciona la relación $d_{k-1}^T y_{k-1} > 0$, entonces la dirección dada por el método (2.5) debe ser igualmente una dirección de descenso. Denote por α^* y $\bar{\alpha}$ los minimizadores unidimensional de f a lo largo d_k y \bar{d}_k respectivamente. Se tiene el siguiente lema para funciones cuadráticas.

Lema 2.1. Suponga que f es dado como es (1.4). Entonces se tiene que

$$\begin{aligned} f(x_k + \alpha^* d_k) - f(x_k + \bar{\alpha} \bar{d}_k) \\ = \frac{(g_k^T d_{k-1})^2 t^2}{2(d_{k-1}^T H d_{k-1})(d_k^T H d_k)} \left[\left(\frac{2}{t} - \bar{\alpha}_k \right) g_k^T \bar{d}_k - \frac{(g_k^T s_{k-1})^2}{s_{k-1}^T y_{k-1}} \right]. \end{aligned} \quad (2.13)$$

Prueba. Por la definición de α^* y $\bar{\alpha}$ se tiene que

$$\alpha^* = -\frac{g_k^T d_k}{d_k^T H d_k} \quad \text{y} \quad \bar{\alpha} = -\frac{g_k^T \bar{d}_k}{\bar{d}_k^T H \bar{d}_k}. \quad (2.14)$$

Veamos por que, dado que

$$f(x_k + \alpha d_k) = g^T(x_k + \alpha d_k) + \frac{1}{2}(x_k + \alpha d_k)^T H(x_k + \alpha d_k)$$

se tiene que

$$\nabla f(x_k + \alpha d_k)^T d_k = g^T d_k + x_k^T H d_k + \alpha d_k^T H d_k$$

y como además

$$\nabla f(x_k + \alpha^* d_k) = 0$$

se tiene que

$$0 = g^T d_k + x_k^T H d_k + \alpha^* d_k^T H d_k$$

de donde

$$\alpha^* = -\frac{g^T d_k + x_k^T H d_k}{d_k^T H d_k} = -\frac{(g^T + x_k^T H) d_k}{d_k^T H d_k}$$

Como $g_k^T = \nabla f(x_k)^T = g^T + x_k^T H$ por (1.4) se tiene que

$$\alpha^* = -\frac{g^T d_k + x_k^T H d_k}{d_k^T H d_k} = -\frac{g_k^T d_k}{d_k^T H d_k}.$$

Lo que se quería mostrar, se hace análogo para $\bar{\alpha}$.

Entonces se tiene que

$$f(x_k + \alpha^* d_k) - f(x_k + \bar{\alpha} \bar{d}_k) = [f(x_k + \alpha^* d_k) - f(x_k)] - [f(x_k + \bar{\alpha} \bar{d}_k) - f(x_k)] \text{ sumando y restando } f(x_k)$$

$$= [g^T(x_k + \alpha^* d_k) + \frac{1}{2}(x_k + \alpha^* d_k)^T H(x_k + \alpha^* d_k) - g^T(x_k) - \frac{1}{2}(x_k)^T H(x_k)] - [g^T(x_k + \bar{\alpha} \bar{d}_k) + \frac{1}{2}(x_k + \bar{\alpha} \bar{d}_k)^T H(x_k + \bar{\alpha} \bar{d}_k) - g^T(x_k) - \frac{1}{2}(x_k)^T H(x_k)] \text{ por (1.4)}$$

$$= g^T(x_k + \alpha^* d_k) + \frac{1}{2}(x_k + \alpha^* d_k)^T H(x_k + \alpha^* d_k) - g^T(x_k) - \frac{1}{2}(x_k)^T H(x_k) - g^T(x_k + \bar{\alpha} \bar{d}_k) - \frac{1}{2}(x_k + \bar{\alpha} \bar{d}_k)^T H(x_k + \bar{\alpha} \bar{d}_k) + g^T(x_k) + \frac{1}{2}(x_k)^T H(x_k)$$

$$\begin{aligned}
&= g^T x_k + \alpha^* g^T d_k + \frac{1}{2} x_k^T H x_k + \frac{1}{2} \alpha^* x_k^T H d_k + \frac{1}{2} \alpha^* d_k^T H x_k + \frac{1}{2} (\alpha^*)^2 d_k^T H d_k - g^T(x_k) - \\
&\frac{1}{2}(x_k)^T H(x_k) - g^T x_k - \bar{\alpha} g^T \bar{d}_k - \frac{1}{2} x_k^T H x_k - \frac{1}{2} \bar{\alpha} x_k^T H \bar{d}_k - \frac{1}{2} \bar{\alpha} \bar{d}_k^T H x_k - \frac{1}{2} (\bar{\alpha})^2 \bar{d}_k^T H \bar{d}_k + g^T(x_k) + \\
&\frac{1}{2}(x_k)^T H(x_k) \\
&= \alpha^* g^T d_k + \alpha^* x_k^T H d_k + \frac{1}{2} (\alpha^*)^2 d_k^T H d_k - \bar{\alpha} g^T \bar{d}_k - \bar{\alpha} x_k^T H \bar{d}_k - \frac{1}{2} (\bar{\alpha})^2 \bar{d}_k^T H \bar{d}_k \\
&= (g + H x_k)^T \alpha^* d_k + \frac{1}{2} (\alpha^*)^2 d_k^T H d_k - (g + H x_k)^T \bar{\alpha} \bar{d}_k - \frac{1}{2} (\bar{\alpha})^2 \bar{d}_k^T H \bar{d}_k \\
&= -\frac{g_k^T d_k}{d_k^T H d_k} g_k^T d_k + \frac{1}{2} \left(\frac{g_k^T d_k}{d_k^T H d_k} \right)^2 d_k^T H d_k + \frac{g_k^T \bar{d}_k}{\bar{d}_k^T H \bar{d}_k} g_k^T \bar{d}_k - \frac{1}{2} \left(\frac{g_k^T \bar{d}_k}{\bar{d}_k^T H \bar{d}_k} \right)^2 \bar{d}_k^T H \bar{d}_k \\
&= -\frac{1}{2} \frac{(g_k^T d_k)^2}{d_k^T H d_k} g_k^T d_k + \frac{1}{2} \frac{(g_k^T \bar{d}_k)^2}{\bar{d}_k^T H \bar{d}_k} g_k^T \bar{d}_k \\
&= \frac{1}{4} \frac{-2(g_k^T d_k)^2 \bar{d}_k^T H \bar{d}_k + 2(g_k^T \bar{d}_k)^2 d_k^T H d_k}{(d_k^T H d_k)(\bar{d}_k^T H \bar{d}_k)} = \frac{\Gamma_K}{2(d_k^T H d_k)(\bar{d}_k^T H \bar{d}_k)} \\
&\qquad\qquad\qquad f(x_k + \alpha^* d_k) - f(x_k + \bar{\alpha} \bar{d}_k) \\
&= [f(x_k + \alpha^* d_k) - f(x_k)] - [f(x_k + \bar{\alpha} \bar{d}_k) - f(x_k)] \\
&\qquad\qquad\qquad = \frac{\Gamma_K}{2(d_k^T H d_k)(\bar{d}_k^T H \bar{d}_k)},
\end{aligned} \tag{2.15}$$

donde

$$\Gamma_K = d_k^T H d_k (g_k^T \bar{d}_k)^2 - \bar{d}_k^T H \bar{d}_k (g_k^T d_k)^2 \tag{2.16}$$

Definiendo

$$\lambda_k := \frac{-g_k^T s_{k-1}}{d_{k-1}^T y_{k-1}} = \frac{-g_k^T d_{k-1}}{d_{k-1}^T H d_{k-1}}. \tag{2.17}$$

$$\text{Dado que } \lambda_k := \frac{-g_k^T s_{k-1}}{d_{k-1}^T y_{k-1}} = \frac{-g_k^T \alpha_{k-1} d_{k-1}}{d_{k-1}^T H \alpha_{k-1} d_{k-1}} = \frac{-g_k^T d_{k-1}}{d_{k-1}^T H d_{k-1}}$$

Se sigue por (2.11), (2.12), (2.6), y (2.17) que

$$d_k = -g_k + \beta_k d_{k-1} \text{ como } \beta_k = \beta_k^{HS} - t \frac{g_k^T s_{k-1}}{d_{k-1}^T y_{k-1}} \text{ se tiene } d_k = -g_k + (\beta_k^{HS} + t \lambda_k) d_{k-1}$$

$$d_k = \bar{d}_k + t \lambda_k d_{k-1}. \tag{2.18}$$

Ademas, ya que $\bar{d}_k^T y_{k-1} = 0$ se tiene que $\bar{d}_k^T H \alpha_{k-1} d_{k-1} = 0$ de donde se obtiene que

$$\bar{d}_k^T H d_{k-1} = 0 \quad (2.19)$$

La sustitución de (2.18) y (2.17) en (2.16) y usando (2.19) se tiene

$$\begin{aligned} \Gamma_K &= (\bar{d}_k + t\lambda_k d_{k-1})^T H (\bar{d}_k + t\lambda_k d_{k-1}) (g_k^T \bar{d}_k)^2 - \bar{d}_k^T H \bar{d}_k (g_k^T (\bar{d}_k + t\lambda_k d_{k-1}))^2 \\ \Gamma_K &= (\bar{d}_k^T H \bar{d}_k + 2t\lambda_k \bar{d}_k^T H d_{k-1} + (t\lambda_k)^2 d_{k-1}^T H d_{k-1}) (g_k^T \bar{d}_k)^2 - \bar{d}_k^T H \bar{d}_k (g_k^T \bar{d}_k + t\lambda_k g_k^T d_{k-1})^2 \end{aligned}$$

Eliminando $\bar{d}_k^T H d_{k-1}$ por (2.19)

$$\begin{aligned} \Gamma_K &= \bar{d}_k^T H \bar{d}_k (g_k^T \bar{d}_k)^2 + (t\lambda_k)^2 d_{k-1}^T H d_{k-1} (g_k^T \bar{d}_k)^2 - \bar{d}_k^T H \bar{d}_k (g_k^T \bar{d}_k)^2 - 2t\lambda_k \bar{d}_k^T H \bar{d}_k g_k^T \bar{d}_k g_k^T d_{k-1} - \\ & (t\lambda_k)^2 \bar{d}_k^T H \bar{d}_k (g_k^T d_{k-1})^2 \end{aligned}$$

cancelando los términos opuestos

$$\Gamma_K = (t\lambda_k)^2 d_{k-1}^T H d_{k-1} (g_k^T \bar{d}_k)^2 - 2t\lambda_k \bar{d}_k^T H \bar{d}_k g_k^T \bar{d}_k g_k^T d_{k-1} - (t\lambda_k)^2 \bar{d}_k^T H \bar{d}_k (g_k^T d_{k-1})^2$$

$$\begin{aligned} \Gamma_K &= t^2 \left(\frac{-g_k^T d_{k-1}}{d_{k-1}^T H d_{k-1}} \right) \\ & \left[\left(\frac{-g_k^T d_{k-1}}{d_{k-1}^T H d_{k-1}} \right) d_{k-1}^T H d_{k-1} (g_k^T \bar{d}_k)^2 - \frac{2}{t} \bar{d}_k^T H \bar{d}_k g_k^T \bar{d}_k g_k^T d_{k-1} - \left(\frac{-g_k^T d_{k-1}}{d_{k-1}^T H d_{k-1}} \right) \bar{d}_k^T H \bar{d}_k (g_k^T d_{k-1})^2 \right] \end{aligned}$$

$$\Gamma_K = t^2 \left(\frac{\bar{d}_k^T H \bar{d}_k (g_k^T d_{k-1})^2}{d_{k-1}^T H d_{k-1}} \right) \left[\frac{(g_k^T \bar{d}_k)^2}{\bar{d}_k^T H \bar{d}_k} + \frac{2}{t} g_k^T \bar{d}_k - \left(\frac{(g_k^T d_{k-1})^2}{d_{k-1}^T H d_{k-1}} \right) \right]$$

$$\Gamma_K = \left(\frac{\bar{d}_k^T H \bar{d}_k (g_k^T d_{k-1})^2}{d_{k-1}^T H d_{k-1}} \right) t^2 \left[\left(\frac{g_k^T \bar{d}_k}{\bar{d}_k^T H \bar{d}_k} + \frac{2}{t} \right) g_k^T \bar{d}_k - \left(\frac{(g_k^T d_{k-1})^2}{d_{k-1}^T H d_{k-1}} \right) \right]$$

$$\Gamma_K = \left(\frac{\bar{d}_k^T H \bar{d}_k (g_k^T d_{k-1})^2}{d_{k-1}^T H d_{k-1}} \right) t^2 \left[\left(\frac{2}{t} - \bar{\alpha}_k \right) g_k^T \bar{d}_k - \left(\frac{(g_k^T d_{k-1})^2}{d_{k-1}^T H d_{k-1}} \right) \right]$$

$$\frac{\Gamma_K}{2d_k^T H d_k} = \left(\frac{\bar{d}_k^T H \bar{d}_k (g_k^T d_{k-1})^2}{2(d_k^T H d_k)(d_{k-1}^T H d_{k-1})} \right) t^2 \left[\left(\frac{2}{t} - \bar{\alpha}_k \right) g_k^T \bar{d}_k - \left(\frac{\alpha_{k-1} (g_k^T d_{k-1})^2}{\alpha_{k-1} d_{k-1}^T y_{k-1}} \right) \right]$$

$$\frac{\Gamma_K}{2(d_k^T H d_k)(\bar{d}_k^T H \bar{d}_k)} = \left(\frac{\bar{d}_k^T H \bar{d}_k (g_k^T d_{k-1})^2}{2(d_k^T H d_k)(\bar{d}_k^T H \bar{d}_k)(d_{k-1}^T H d_{k-1})} \right) t^2 \left[\left(\frac{2}{t} - \bar{\alpha}_k \right) g_k^T \bar{d}_k - \left(\frac{(g_k^T s_{k-1})^2}{s_{k-1}^T y_{k-1}} \right) \right]$$

$$f(x_k + \alpha^* d_k) - f(x_k + \bar{\alpha} \bar{d}_k) = \frac{\Gamma_K}{2(d_k^T H d_k)(\bar{d}_k^T H \bar{d}_k)}$$

$$f(x_k + \alpha^* d_k) - f(x_k + \bar{\alpha} \bar{d}_k) = \left(\frac{(g_k^T d_{k-1})^2 t^2}{2(d_k^T H d_k)(d_{k-1}^T H d_{k-1})} \right) \left[\left(\frac{2}{t} - \bar{\alpha}_k \right) g_k^T \bar{d}_k - \left(\frac{(g_k^T s_{k-1})^2}{s_{k-1}^T y_{k-1}} \right) \right]$$

La relación anterior indica que si $\bar{\alpha}_k$ a sido bien estimado, y si

$$\tau_k = \bar{\alpha}_k g_k^T \bar{d}_k + \frac{(g_k^T s_{k-1})^2}{s_{k-1}^T y_{k-1}} < 0, \quad (2.20)$$

entonces una buena escogencia de t es tal que

$$t = \frac{g_k^T \bar{d}_k}{\tau_k}, \quad (2.21)$$

el cual minimiza el valor en (2.13) .

Veamos de donde se obtuvo el t

Veamos que sea

$$\Phi(t) = \left(\frac{(g_k^T d_{k-1})^2}{2(d_k^T H d_k)(d_{k-1}^T H d_{k-1})} \right) t^2 \left[\left(\frac{2}{t} - \bar{\alpha}_k \right) g_k^T \bar{d}_k - \left(\frac{(g_k^T s_{k-1})^2}{s_{k-1}^T y_{k-1}} \right) \right] \text{ y llamemos}$$

$$A = \frac{(g_k^T d_{k-1})^2}{2(d_k^T H d_k)(d_{k-1}^T H d_{k-1})}, \quad B = g_k^T \bar{d}_k, \text{ y } C = \frac{(g_k^T s_{k-1})^2}{s_{k-1}^T y_{k-1}}$$

$$\Phi(t) = At^2 \left[\left(\frac{2}{t} - \bar{\alpha}_k \right) B - C \right] \text{ asi}$$

$$\Phi'(t) = 2At \left[\left(\frac{2}{t} - \bar{\alpha}_k \right) B - C \right] + At^2 \left[\frac{-2B}{t^2} \right] = 2At \left[\left(\frac{2}{t} - \bar{\alpha}_k \right) B - C \right] - 2AB$$

$$\Phi'(t) = 4AB - 2t\bar{\alpha}_k AB - 2tAC - 2AB = 2AB - [2\bar{\alpha}_k AB + 2AC]t,$$

si $\Phi'(t) = 0$ se tiene que

$$t = \frac{2AB}{2\bar{\alpha}_k AB + 2AC} = \frac{B}{\bar{\alpha}_k B + C} = \frac{g_k^T \bar{d}_k}{\bar{\alpha}_k g_k^T \bar{d}_k + \frac{(g_k^T s_{k-1})^2}{s_{k-1}^T y_{k-1}}}, \text{ con } \tau_k = \bar{\alpha}_k g_k^T \bar{d}_k + \frac{(g_k^T s_{k-1})^2}{s_{k-1}^T y_{k-1}}$$

$\Phi''(t) = -[2AB\bar{\alpha}_k + 2AC] = -2A[B\bar{\alpha}_k + C] = -2A\tau_k > 0$ ya que $A > 0$ y $\tau_k < 0$ por lo que t es mínimo

De cualquier modo se debe ver que la información ya alcanzada a lo largo de \bar{d}_k no es suficiente para tener una buena estimación sobre $\bar{\alpha}_k$ de hecho, la forma de calcular la longitud de paso en los métodos de gradiente conjugado sigue siendo objeto de estudio. Por lo tanto, no se ocupan de la forma de estimación $\bar{\alpha}_k$ en una buena manera, sólo simplemente observamos que existe cierta constante M tal que

$$\bar{\alpha}_k \leq M, \quad \text{para todo } k \geq 1. \quad (2.22)$$

En este caso se puede escoger t a ser alguna constante de manera que

$$t \leq \frac{2}{M}. \quad (2.23)$$

Entonces por esto y por (2.22) se tiene que

$$\frac{2}{t} - \bar{\alpha}_k \geq 0 \quad (2.24)$$

La ecuación (2.24), (2.13), y la condición $g_k^T \bar{d}_k < 0$ indica que

$$f(x_k + \alpha^* d_k) \leq f(x_k + \bar{\alpha} \bar{d}_k) \quad (2.25)$$

Donde se muestra que el método es mejor que el método de HS.

En experimentos numéricos se obtuvieron buenos resultados mediante el establecimiento de $t = 0,1$ (véase la Sección 4).

En la próxima sección se probará la convergencia global del método (2.5) para funciones uniformemente convexas. Para funciones generales, Powell [10] construye un ejemplo mostrando que el método PRP puede ciclar sin acercarse a ningún punto solución si la longitud de paso α_k es elegida para ser el primer minimizador local a lo largo de d_k . Debido a que el método (2.5) se reduce al PRP si se tiene que $g_k^T d_{k-1} = 0$, el ejemplo también muestra que el método (2.5) no necesariamente converge para funciones generales. Por lo tanto, como Gilbert y Nocedal [3], quienes han probado la convergencia global del método PRP con la restricción que $\beta_k^{PRP} \geq 0$, se reemplaza (2.5) por

$$\beta_k = \max \left\{ \frac{g_k^T y_{k-1}}{d_{k-1}^T y_{k-1}}, 0 \right\} - t \frac{g_k^T s_{k-1}}{d_{k-1}^T y_{k-1}}, \quad (2.26)$$

y demuestra que esta modificación de (2.5) es globalmente convergente para funciones generales.

Se llamará al método definido por (1.2)-(1.3) con β_k de (2.26) como método (2.26).

CAPÍTULO 3

ANÁLISIS DE CONVERGENCIA

A continuación se presenta, en detalle, el desarrollo del análisis de convergencia que realizaron Dai y Liao en su artículo [13]. La estrategia consiste en demostrar que la sucesión de iterados x_k tiene una subsucesión la cual converge a un punto estacionario. Esta característica sumada a la certeza de que cada dirección de búsqueda es una dirección de descenso, aunado a la búsqueda unidimensional de Wolfe Fuerte la cual esta orientada hacia la minimización garantizando que la subsucesión converge hacia un mínimo local.

A lo largo de esta sección se va a suponer que

$$g_k \neq 0, \quad \text{para todo } k \geq 1, \quad (3.1)$$

de otro modo se ha encontrado un punto estacionario. Se asumirá que existe una constante $c \geq 0$ tal que

$$g_k^T d_k < -c \|g_k\|^2, \quad \text{para todo } k \geq 1. \quad (3.2)$$

La relación (3.2) implica que cada dirección de búsqueda d_k es una dirección de descenso. Si la constante c es estrictamente mayor que cero, lo cual es necesario en el teorema (3.6), entonces de (3.2) se sabe que la así llamada condición de descenso suficiente se tiene.

Se hacen las siguientes suposiciones básicas sobre la función objetivo.

Suposiciones 3.1

- (i) El conjunto de nivel $\mathcal{L} = \{x | f(x) \leq f(x_1)\}$ es acotado, es decir, existe una constante $B > 0$ tal que

$$\|x\| \leq B, \quad \text{para todo } x \in \mathcal{L}. \quad (3.3)$$

(ii) En alguna vecindad \mathfrak{N} de \mathcal{L} , f es continuamente diferenciable, y su gradiente es Lipschitz continuo; es decir existe una constante $L > 0$ tal que

$$\|\nabla f(x) - \nabla f(\bar{x})\| \leq L\|x - \bar{x}\| \quad \text{para todo } x, \bar{x} \in \mathfrak{N}. \quad (3.4)$$

Bajo las suposiciones anteriores sobre f , allí existe una constante $\bar{\gamma} \geq 0$ tal que

$$\|\nabla f(x)\| \leq \bar{\gamma} \quad \text{para todo } x \in \mathcal{L}. \quad (3.5)$$

La longitud del paso α_k en (1.2) se obtiene mediante algún esquema de línea de búsqueda. En método de gradientes conjugados, la condición de Wolfe fuerte, viene dada

$$f(x_k + \alpha_k d_k) - f_k \leq \delta \alpha_k g_k^T d_k, \quad (3.6)$$

$$|g(x_k + \alpha_k d_k)^T d_k| \leq -\sigma g_k^T d_k, \quad (3.7)$$

donde $0 < \delta < \sigma < 1$, son a menudo impuesta sobre la línea de búsqueda (en este caso se llamara a la búsqueda lineal búsqueda de Wolfe fuerte).

Para cualquier método de gradiente conjugado con la línea de búsqueda de Wolfe fuerte, se tiene el siguiente resultado general, el cual es obtenido en [2].

Lema 3.2. Bajo las Suposiciones 3.1. Considere cualquier método de gradiente conjugado en la forma (1.1)-(1.2), donde d_k es una dirección de descenso y α_k es obtenido por línea de búsqueda inexacta de Wolfe fuerte. Si

$$\sum_{k \geq 1} \frac{1}{\|d_k\|^2} = \infty \quad (3.8)$$

se tiene que

$$\liminf_{k \rightarrow \infty} \|g_k\| = 0 \quad (3.9)$$

Para funciones uniformemente convexa, se puede probar que la norma de d_k generada por el método (2.5) es acotada por encima. Así por el Lema 3.2 se tiene inmediatamente el siguiente resultado.

Teorema 3.3. Bajo las Suposiciones 3.1. Considere el método (2.5), donde d_k es una dirección descenso y α_k es obtenido por línea de búsqueda inexacta de Wolfe fuerte. Si existe una constante $\mu > 0$ tales que

$$(\nabla f(x) - \nabla f(\bar{x}))^T(x - \bar{x}) \geq \mu \|x - \bar{x}\|^2, \quad \text{para todo } x, \bar{x} \in \mathcal{L}, \quad (3.10)$$

se tiene que

$$\lim_{k \rightarrow \infty} g_k = 0 \quad (3.11)$$

Prueba: se sigue de (3.10) que f es una función uniformemente convexa en \mathcal{L} (pues el Hessiano es defidido positivo por (1.8))y

$$\begin{aligned} & (\nabla f(x) - \nabla f(\bar{x}))^T(x - \bar{x}) \geq \mu \|x - \bar{x}\|^2 \\ \Rightarrow & y_{k-1}^T s_{k-1} \geq \mu \|s_{k-1}\|^2 \\ \Rightarrow & y_{k-1}^T \alpha_{k-1} d_{k-1} \geq \mu \alpha_{k-1}^2 \|d_{k-1}\|^2 \end{aligned}$$

$$d_{k-1}^T y_{k-1} \geq \mu \alpha_{k-1} \|d_{k-1}\|^2. \quad (3.12)$$

Por

$$\begin{aligned} d_k &= -g_k + \beta_k d_{k-1} \text{ por (1.3)} \\ \|d_k\| &\leq \|g_k\| + \|\beta_k\| \|d_{k-1}\| \text{ por desigualdad Cauchy-Schwarz} \\ \|d_k\| &\leq \|g_k\| + \left\| \frac{g_k^T (y_{k-1} - t s_{k-1})}{d_{k-1}^T y_{k-1}} \right\| \|d_{k-1}\| \text{ por (2.5)} \\ \|d_k\| &\leq \|g_k\| + \frac{\|g_k^T (y_{k-1} - t s_{k-1})\|}{\mu \alpha_{k-1} \|d_{k-1}\|^2} \|d_{k-1}\| \\ \|d_k\| &\leq \|g_k\| + \|g_k\| \frac{L \|s_{k-1}\| + t \|s_{k-1}\|}{\mu \|s_{k-1}\|} \text{ por (3.4), (3.5), y (3.12), se tiene que} \end{aligned}$$

$$\|d_k\| \leq \|g_k\| + \frac{(L+t) \|g_k\| \|s_{k-1}\|}{\mu \alpha_{k-1} \|d_{k-1}\|^2} \|d_{k-1}\| \leq \mu^{-1} (L+t+\mu) \bar{\gamma}. \quad (3.13)$$

Lo cual implica lo cierto de (3.8).

Ya que Sea $Y = \mu^{-1} (L+t+\mu) \bar{\gamma}$ se tiene que

$\frac{1}{Y} \leq \frac{1}{\|d_k\|} \Rightarrow \frac{1}{Y^2} \leq \frac{1}{\|d_k\|^2} \Rightarrow \sum_{k \geq 1} \frac{1}{Y^2} \leq \sum_{k \geq 1} \frac{1}{\|d_k\|^2}$ como la primera serie diverge, igual la segunda pues esta la obliga.

Por lo tanto por Lema 3.2 se tiene (3.9), lo cual es equivalente a (3.11) para funciones

uniformemente convexa.

Para funciones generales, como el método (2.5) es el mismo que el método PRP en el caso de líneas de búsquedas exactas, es conocido del contra ejemplo en [10] que el método (2.5) puede igual ciclar sin acercarse a algún punto solución. No obstante, se va a demostrar que su modificación, método (2.26), es globalmente convergente para funciones generales. La prueba de este resultado sigue la misma como en [3] para su método con $\beta_k = \max\{\beta_k^{PRP}, 0\}$. Sin embargo, el resultado permite valores negativos de β_k ya que por (2.26), se tiene que

$$\beta_k \geq -t \frac{g_k^T s_{k-1}}{d_{k-1}^T y_{k-1}}. \quad (3.14)$$

Además, se podrá notar que si tiene la siguiente relación

$$\frac{g_k^T g_{k-1}}{\|g_k\|^2} \geq 1, \quad (3.15)$$

se puede ver que se cumple cuando $g_k^T y_{k-1} = g_k^T (g_k - g_{k-1}) \leq 0$ se sigue lo anterior, el método (2.26) se reinicia con la dirección

$$d_k = -g_k - t \frac{g_k^T s_{k-1}}{d_{k-1}^T y_{k-1}} d_{k-1}. \quad (3.16)$$

Ya que esta dirección podría incluir algunas información de segundo orden, es razonable esperar que esta dirección sea mejor que el opuesto del gradiente negativo $-g_k$, como un reinicio de dirección.

Lema 3.4. Bajo las suposiciones 3.1. Considere el método (2.26), donde d_k es una dirección de descenso y α_k es obtenido por línea de búsqueda de de Wolfe fuerte. Si existe una constante $\gamma > 0$ tal que

$$\|g_k\| \geq \gamma, \quad \text{para todo } k \geq 1, \quad (3.17)$$

entonces $d_k \neq 0$ y

$$\sum_{k \geq 2} \|u_k - u_{k-1}\|^2 < \infty, \quad (3.18)$$

donde $u_k = \frac{d_k}{\|d_k\|}$.

Prueba: Primero notemos que $d_k \neq 0$, en otro caso (3.2) sería falso. Por lo tanto u_k esta

bien definido. Además por la relación (3.17) y el Lema 3.2 dado que $\sum_{k \geq 1} \frac{1}{\|d_k\|^2} = \infty \Rightarrow \liminf_{k \rightarrow \infty} \|g_k\| = 0$, como $\liminf_{k \rightarrow \infty} \|g_k\| \neq 0$ se tiene que

$$\sum_{k \geq 1} \frac{1}{\|d_k\|^2} < \infty, \quad (3.19)$$

en otro caso (3.9) se tiene, contradiciendo (3.17). Ahora si dividimos la fórmula (2.26) de β_k en dos parte se sigue :

$$\beta_k^{(1)} = \max \left\{ \frac{g_k^T y_{k-1}}{d_{k-1}^T y_{k-1}}, 0 \right\} \text{ y } \beta_k^{(2)} = -t \frac{g_k^T s_{k-1}}{d_{k-1}^T y_{k-1}}, \quad (3.20)$$

y definiendo

$$r_k := \frac{\nu_k}{\|d_k\|} \text{ y } \delta_k := \frac{\beta_k^{(1)} \|d_{k-1}\|}{\|d_k\|}, \quad (3.21)$$

donde

$$\nu_k = -g_k + \beta_k^{(2)} d_{k-1}. \quad (3.22)$$

Y por (1.3) se tiene que para $k \geq 2$

$$d_k = -g_k + \beta_k d_{k-1} = -g_k + \beta_k^{(1)} d_{k-1} + \beta_k^{(2)} d_{k-1}$$

$$\begin{aligned} \Rightarrow \frac{d_k}{\|d_k\|} &= \frac{\beta_k^{(1)} d_{k-1} \|d_{k-1}\|}{\|d_k\| \|d_{k-1}\|} + \frac{-g_k + \beta_k^{(2)} d_{k-1}}{\|d_k\|} \\ \Rightarrow \frac{d_k}{\|d_k\|} &= u_{k-1} \frac{\beta_k^{(1)} \|d_{k-1}\|}{\|d_k\|} + \frac{\nu_k}{\|d_k\|} \end{aligned}$$

obteniendo así

$$u_k = r_k + u_{k-1} \delta_k \quad (3.23)$$

Usando la identidad $\|u_k\| = \|u_{k-1}\|$ dado que son vectores unitarios por lo tanto su norma es igual a 1 y (3.23) se puede mostrar que

$$\|r_k\| = \|u_k - \delta_k u_{k-1}\| = \|\delta_k u_k - u_{k-1}\|. \quad (3.24)$$

Se ve que si se eleva la ecuación anterior al cuadrado se obtiene el resultado esperado

$$\begin{aligned} \|r_k\|^2 &= \|u_k - \delta_k u_{k-1}\|^2 = \|\delta_k u_k - u_{k-1}\|^2 \\ \|u_k - \delta_k u_{k-1}\|^2 &= \|u_k\|^2 - 2\delta_k u_k^T u_{k-1} + \delta_k^2 \|u_{k-1}\|^2 = 1 - 2\delta_k u_k^T u_{k-1} + \delta_k^2 \\ \|\delta_k u_k - u_{k-1}\|^2 &= \delta_k^2 \|u_k\|^2 - 2\delta_k u_k^T u_{k-1} + \|u_{k-1}\|^2 = \delta_k^2 - 2\delta_k u_k^T u_{k-1} + 1. \end{aligned}$$

Usando la condición de que $\delta_k \geq 0$, la desigualdad triangular, y (3.24), se obtiene

$$\begin{aligned} \|u_k - u_{k-1}\| &\leq \|(1 + \delta_k)u_k - (1 + \delta_k)u_{k-1}\| \\ &\leq \|u_k - \delta_k u_{k-1}\| + \|\delta_k u_k - u_{k-1}\| \\ &= 2\|r_k\| \end{aligned} \quad (3.25)$$

Por otra parte, de la línea de búsqueda de la condición (3.7) se tiene que

$$|g_k^T d_{k-1}| \leq -\sigma g_{k-1}^T d_{k-1}$$

$$g_k^T d_{k-1} \geq \sigma g_{k-1}^T d_{k-1} \Rightarrow g_k^T d_{k-1} - g_{k-1}^T d_{k-1} \geq \sigma g_{k-1}^T d_{k-1} - g_{k-1}^T d_{k-1} \text{ obteniendo así}$$

$$y_{k-1}^T d_{k-1} \geq (\sigma - 1) g_{k-1}^T d_{k-1}. \quad (3.26)$$

De (3.26), (3.7), y la suposición de $g_{k-1}^T d_{k-1} < 0$ implica que

$$\|y_{k-1}^T d_{k-1}\| \geq (1 - \sigma) \|g_{k-1}^T d_{k-1}\| \Rightarrow \frac{1}{(1 - \sigma)} \geq \frac{\|g_{k-1}^T d_{k-1}\|}{\|y_{k-1}^T d_{k-1}\|} \Rightarrow \sigma \frac{1}{(1 - \sigma)} \geq \frac{\|g_k^T d_{k-1}\|}{\|g_{k-1}^T d_{k-1}\|} \frac{\|g_{k-1}^T d_{k-1}\|}{\|y_{k-1}^T d_{k-1}\|}$$

(por propiedad de valor absoluto)

obteniendo así

$$\frac{\sigma}{(1 - \sigma)} \geq \frac{\|g_k^T d_{k-1}\|}{\|y_{k-1}^T d_{k-1}\|}. \quad (3.27)$$

Se sigue de la definición de ν_k , (3.27), (3.3), y (3.5) que

$$\begin{aligned} \|\nu_k\| &= \|-g_k + \beta_k^{(2)} d_{k-1}\| \leq \|g_k\| + \|-t \frac{g_k^T s_{k-1}}{d_{k-1} y_{k-1}} d_{k-1}\| = \|g_k\| + \|-t \frac{g_k^T \alpha_{k-1} d_{k-1}}{d_{k-1} y_{k-1}} d_{k-1}\| \\ &\|g_k\| + \|-t \frac{g_k^T d_{k-1}}{d_{k-1} y_{k-1}} s_{k-1}\| = \|g_k\| + t \left| \frac{g_k^T d_{k-1}}{d_{k-1} y_{k-1}} \right| \|s_{k-1}\| \leq \bar{\gamma} + t \frac{\sigma}{(1 - \sigma)} \|x_k + x_{k-1}\| \\ &\leq \bar{\gamma} + t \frac{\sigma}{(1 - \sigma)} (\|x_k\| + \|x_{k-1}\|) \text{ obteniendo así} \end{aligned}$$

$$\|\nu_k\| \leq \|g_k\| + t \left| \frac{g_k^T d_{k-1}}{d_{k-1} y_{k-1}} \right| \|s_{k-1}\| \leq \bar{\gamma} + 2t\sigma(1 - \sigma)^{-1} B. \quad (3.28)$$

Por lo tanto por (3.25), (3.21), (3.19)

$$\begin{aligned} \|u_k - u_{k-1}\| &\leq 2\|r_k\| \Rightarrow \|u_k - u_{k-1}\|^2 \leq 4\|r_k\|^2 \Rightarrow \|u_k - u_{k-1}\|^2 \leq 4 \frac{\|\nu_k\|^2}{\|d_k\|^2} \\ &\Rightarrow \sum_{k \geq 2} \|u_k - u_{k-1}\|^2 \leq 4(\bar{\gamma} + 2t\sigma(1 - \sigma)^{-1} B)^2 \sum_{k \geq 2} \frac{1}{\|d_k\|^2}. \end{aligned}$$

Con lo que se sabe que (3.18) se tiene, lo cual completa la prueba.

Ahora el estado de una propiedad de la fórmula (2.26) para β_k , que es similar pero ligeramente diferente de la propiedad (*) en [3]. Suponga que la suposición 3.1 y las relaciones (3.7) y (3.17) se tienen. Entonces, si se tiene (3.2) para alguna constante $c > 0$, se afirman que existen constantes $b > 0$ y $\lambda > 0$ tales que para todo k ,

$$|\beta_k| \leq b, \quad (3.29)$$

y

$$\|s_{k-1}\| \leq \lambda \Rightarrow |\beta_k| \leq \frac{1}{b}. \quad (3.30)$$

De hecho, por (3.26), (3.2), y (3.17), se tiene que

$$d_{k-1}^T y_{k-1} \geq (\sigma - 1) g_{k-1}^T d_{k-1} \geq (1 - \sigma) c \|g_{k-1}\|^2 \geq (1 - \sigma) c \gamma^2. \quad (3.31)$$

Usando esto, (3.3), (3.4), y (3.5) se obtiene que

$$\beta_k = \frac{g_k^T(y_{k-1} - ts_{k-1})}{d_{k-1}^T y_{k-1}} \Rightarrow |\beta_k| = \left| \frac{g_k^T(y_{k-1} - ts_{k-1})}{d_{k-1}^T y_{k-1}} \right| \Rightarrow |\beta_k| \leq \frac{\|g_k\| \|y_{k-1} - ts_{k-1}\|}{|d_{k-1}^T y_{k-1}|}$$

$$|\beta_k| \leq \frac{\|g_k\| (\|y_{k-1}\| + t\|s_{k-1}\|)}{(1-\sigma)c\gamma^2} \Rightarrow |\beta_k| \leq \frac{\|g_k\| (L\|s_{k-1}\| + t\|s_{k-1}\|)}{(1-\sigma)c\gamma^2} \text{ obteniendo asi}$$

$$|\beta_k| \leq \frac{(L+t)\|g_k\|\|s_{k-1}\|}{(1-\sigma)c\gamma^2} \leq \frac{2(L+t)\bar{\gamma}B}{(1-\sigma)c\gamma^2} =: b \quad (3.32)$$

Note que b puede ser definido tal que $b > 1$. Por lo tanto se dice que $b > 1$. Como resultado se define

$$\lambda =: \frac{(1-\sigma)c\gamma^2}{b(L+t)\bar{\gamma}}. \quad (3.33)$$

Obteniendo de la primera desigualdad en (3.32) que si $\|s_{k-1}\| \leq \lambda$, entonces

$$|\beta_k| \leq \frac{(L+t)\bar{\gamma}\lambda}{(1-\sigma)c\gamma^2} = \frac{1}{b} \quad (3.34)$$

Asi para b y λ en (3.32) y (3.33), las relaciones (3.29) y (3.30) se tienen.

Sea N^* el conjunto de los números enteros positivos. Para $\lambda > 0$ y un Δ entero positivo, se denota

$$\kappa_{k,\Delta}^\lambda := \{i \in N^* : k \leq i \leq k + \Delta - 1, \|s_{i-1}\| > \lambda\}. \quad (3.35)$$

Donde $|\kappa_{k,\Delta}^\lambda|$ denota el número de elementos en $\kappa_{k,\Delta}^\lambda$. De la anterior propiedad de la fórmula (2.26), se puede probar el siguiente Lema.

Lema 3.5. Bajo las suposiciones 3.1. Considere el método (2.26), en donde d_k satisface las condiciones de (3.2) con $c > 0$, y α_k es obtenido por línea de búsqueda de Wolfe fuerte. Entonces si (3.17) se tiene, existe $\lambda > 0$ tales que, para cualquier $\Delta \in N^*$ y cualquier índice k_0 , existe un índice $k > k_0$ tales que

$$|\kappa_{k,\Delta}^\lambda| > \frac{\Delta}{2}. \quad (3.36)$$

Prueba: Se procedera por contradicción. Suponga que para cualquier λ existe $\Delta \in N^*$ y k_0 tales que

$$|\kappa_{k,\Delta}^\lambda| \leq \frac{\Delta}{2}, \quad \text{para todo } k \geq k_0. \quad (3.37)$$

Sea $b > 0$ y $\lambda > 0$ dados por (3.32) y (3.33). Para $\lambda > 0$ se escogen Δ y k_0 tal que (3.37) se tiene. Entonces se sigue de (3.29), (3.30) y (3.37) que;

Si el número de elementos de $\kappa_{k,\Delta}^\lambda$ es $|\kappa_{k,\Delta}^\lambda| = \frac{\Delta}{2}$ se tiene que $\frac{\Delta}{2}$ elementos cumplen que $|\beta_k| \leq b$ y los otros $\frac{\Delta}{2}$ que no cumplen con $\kappa_{k,\Delta}^\lambda$ pero que están en el conjunto con $\|s_{k-1}\| \leq \lambda$ cumplen que $|\beta_k| \leq \frac{1}{b}$ así se tiene que la igualdad se cumple.

En el caso de que el número de elementos en $\kappa_{k,\Delta}^\lambda$ sea $|\kappa_{k,\Delta}^\lambda| < \frac{\Delta}{2}$ se tiene que el número de elementos que satisfacen $\kappa_{k,\Delta}^\lambda$ es menor que el que la satisfacen, así se tiene que

$$\prod_{k_0+i\Delta+1}^{k_0+(i+1)\Delta} |\beta_k| \leq b^{\Delta/2} \left(\frac{1}{b}\right)^{\Delta/2} = 1, \quad \text{para cualquier } i \geq 0. \quad (3.38)$$

Si $\beta_k = 0$, la dirección en (1.3) se reduce a $-g_k$ entonces o los métodos dados convergen a la relación (3.9) o podemos tomar x_k como un punto inicial. Así se asume sin pérdida de generalidad que

$$\beta_k \neq 0, \quad \text{para todo } k \geq 1. \quad (3.39)$$

Se sigue de (3.38) y (3.39) que como

$$\prod_{k_0+i\Delta+1}^{k_0+(i+1)\Delta} |\beta_k| \leq 1 \Rightarrow \prod_{k_0+i\Delta+1}^{k_0+(i+1)\Delta} \frac{1}{|\beta_k|} \geq 1 \Rightarrow \prod_{k_0+i\Delta+1}^{k_0+(i+1)\Delta} \frac{1}{\beta_k^2} \geq 1$$

obteniendo así

$$\prod_{j=2}^{k_0+i\Delta} \beta_j^{-2} \geq \prod_{j=2}^{k_0} \beta_j^{-2} \quad \text{para todo } i \geq 0. \quad (3.40)$$

lo que indica que

$$\sum_{k \geq 2} \prod_{j=2}^k \beta_j^{-2} = \infty. \quad (3.41)$$

Por (3.41) se puede mostrar (vease [1]) que cualquier método de gradiente conjugado con línea de búsqueda de Wolfe fuerte da la relación (3.9). De hecho, se sigue de (1.3) que para todo $k \geq 2$,

$$d_k + g_k = \beta_k d_{k-1}. \quad (3.42)$$

Elevando al cuadrado en ambos lados de (3.42), se puede obtener

$$\begin{aligned}\|d_k\|^2 &= -2g_k^T d_k - \|g_k\|^2 + \beta_k^2 \|d_{k-1}\|^2 \\ &\leq \frac{(g_k^T d_k)^2}{\|g_k\|^2} + \beta_k^2 \|d_{k-1}\|^2.\end{aligned}\tag{3.43}$$

Dado que $0 \leq (g_k + d_k)^2$. Por lo tanto se tiene

$$\begin{aligned}\|d_k\|^2 - \frac{(g_k^T d_k)^2}{\|g_k\|^2} &\leq \beta_k^2 \|d_{k-1}\|^2 \\ \|d_k\|^2 &\leq \left(1 - \frac{(g_k^T d_k)^2}{\|g_k\|^2 \|d_k\|^2}\right)^{-1} \beta_k^2 \|d_{k-1}\|^2 \\ &\leq \left(1 - \frac{(g_k^T d_k)^2}{\|g_k\|^2 \|d_k\|^2}\right)^{-1} \beta_k^2 \left(1 - \frac{(g_{k-1}^T d_{k-1})^2}{\|g_{k-1}\|^2 \|d_{k-1}\|^2}\right)^{-1} \beta_{k-1}^2 \|d_{k-2}\|^2 \\ &\leq \dots \\ &\leq \prod_{j=j_0}^k \left(1 - \frac{(g_j^T d_j)^2}{\|g_j\|^2 \|d_j\|^2}\right)^{-1} \prod_{j=j_0}^k \beta_j^2 \|d_{j_0-1}\|^2\end{aligned}\tag{3.44}$$

donde $j_0 \geq 2$ es cualquier entero. Es conocido de [12] que cualquier método de descenso (1.2) con línea de búsqueda lineal de Wolfe da la relación

$$\sum_{k \geq 1} \frac{(g_k^T d_k)^2}{\|g_k\|^2} < \infty.\tag{3.45}$$

Esto junto con (3.17) indica que existe alguna constante j_0 tal que

$$\prod_{j \geq j_0} \left(1 - \frac{(g_j^T d_j)^2}{\|g_j\|^2 \|d_j\|^2}\right) \geq c_1 \quad \text{para alguna constante } c_1 > 0.\tag{3.46}$$

de (3.41), (3.44), y (3.46), se conoce que (3.8) se tiene, es decir

$$\begin{aligned}\sum_{k \geq 1} \frac{1}{\|d_k\|^2} &\geq \prod_{j=j_0}^k \left(1 - \frac{(g_j^T d_j)^2}{\|g_j\|^2 \|d_j\|^2}\right) \sum_{k \geq 1} \prod_{j=j_0}^k (\beta_j^2)^{-1} (\|d_{j_0-1}\|^2)^{-1} \\ &\Rightarrow \sum_{k \geq 1} \frac{1}{\|d_k\|^2} \geq c_1 (\|d_{j_0-1}\|^2)^{-1} \sum_{k \geq 1} \prod_{j=j_0}^k (\beta_j^2)^{-1}\end{aligned}$$

Por Lema 3.2 se tiene (3.9). Esto da una contradicción con (3.17). A si (3.36) debe ser verdadero.

Se nota que (3.41) es igual una condición suficiente para la convergencia global de cualquier método de gradiente conjugado con línea de búsqueda de Wolfe, como se muestra en [1]. Ahora se puede probar el siguiente teorema de convergencia del método (2.26).

Teorema 3.6. Bajo las suposiciones 3.1. Considere el método (2.26), donde d_k satisface la condición (3.2) con $c > 0$, y α_k es obtenido por línea de búsqueda de Wolfe. Entonces se tiene que $\liminf_{k \rightarrow \infty} \|g_k\| = 0$.

Demostración.

Se procederá por reducción al absurdo. Si $\liminf_{k \rightarrow \infty} \|g_k\| > 0$. (3.17) se debe tener. Entonces las condiciones de los Lemas (3.4) y (3.5) se tienen. Definiendo $u_i = d_i / \|d_i\|$, y para dos índice cualquiera l, k , con $l \geq k$, se tiene que como

$$\begin{aligned} x_k &= x_{k-1} + s_{k-1} \\ x_{k+1} &= x_k + s_k \\ &\vdots \\ x_l &= x_{l-1} + s_{l-1} \\ x_l &= x_{k-1} + s_{k-1} + \dots + s_{l-2} + s_{l-1} \end{aligned}$$

Como $s_k = \alpha_k d_k = \alpha_k \|d_k\| u_k = \|\alpha_k d_k\| u_k = \|s_k\| u_k$ dado que $d_k = \|d_k\| u_k$ se tiene que

$$\begin{aligned} x_l - x_{k-1} &= \sum_{i=k}^l \|s_{i-1}\| u_{i-1} \\ &= \sum_{i=k}^l \|s_{i-1}\| u_{i-1} + \sum_{i=k}^l \|s_{i-1}\| u_{k-1} - \sum_{i=k}^l \|s_{i-1}\| u_{k-1} \\ &= \sum_{i=k}^l \|s_{i-1}\| u_{k-1} + \sum_{i=k}^l \|s_{i-1}\| (u_{i-1} - u_{k-1}). \end{aligned} \tag{3.47}$$

Esta relación, el hecho que $\|u_{k-1}\| = 1$, y (3.3) se tiene que

$$\begin{aligned} \sum_{i=k}^l \|s_{i-1}\| u_{k-1} &= x_l - x_{k-1} - \sum_{i=k}^l \|s_{i-1}\| (u_{i-1} - u_{k-1}) \\ \sum_{i=k}^l \|s_{i-1}\| &\leq \|x_l\| + \|x_{k-1}\| + \sum_{i=k}^l \|s_{i-1}\| \|u_{i-1} - u_{k-1}\| \\ &\leq 2B + \sum_{i=k}^l \|s_{i-1}\| \|u_{i-1} - u_{k-1}\|. \end{aligned} \quad (3.48)$$

Sea $\lambda > 0$ dado por el Lema 3.5 y se define $\Delta := \lceil 8B/\lambda \rceil$ a ser el más pequeño entero no menor que $8B/\lambda$. Por Lema 3.4 se puede encontrar un índice $k_0 > 1$ tal que

$$\sum_{i \geq k_0} \|u_k - u_{k-1}\|^2 \leq \frac{1}{4\Delta}. \quad (3.49)$$

Con este Δ y k_0 , el Lema 3.5 da un índice $k > k_0$ tal que

$$|\kappa_{k,\Delta}^\lambda| > \frac{\Delta}{2}. \quad (3.50)$$

Se sigue que para cualquier índice $i \in [k, k + \Delta - 1]$, por la desigualdad de Cauchy-Schwarz y (3.49),

$$\begin{aligned} \|u_i - u_{k-1}\| &= \|u_i - u_{i-1} + u_{i-1} - u_{i-2} + u_{i-2} - u_{i-3} + \dots + u_k - u_{k-1}\| \\ &\leq \sum_{j=k}^i \|u_j - u_{j-1}\| \\ &\text{por la desigualdad de Holder} \\ &\leq \left(\sum_{j=k}^i \|u_j - u_{j-1}\|^2 \right)^{1/2} \left(\sum_{j=k}^i 1^2 \right)^{1/2} \\ &= \left(\sum_{j=k}^i \|u_j - u_{j-1}\|^2 \right)^{1/2} (i - k + 1)^{1/2} \\ &\leq \left(\frac{1}{4\Delta} \right)^{1/2} \Delta^{1/2} = \frac{1}{2}. \end{aligned} \quad (3.51)$$

Por esta relación, (3.50) y tomando $l = k + \Delta - 1$ en (3.48), se tiene que

$$\begin{aligned}
 2B + \frac{1}{2} \sum_{i=k}^{k+\Delta-1} \|s_{i-1}\| &\geq \sum_{i=k}^{k+\Delta-1} \|s_{i-1}\| \\
 \Rightarrow 2B &\geq \frac{1}{2} \sum_{i=k}^{k+\Delta-1} \|s_{i-1}\| \geq \frac{1}{2} \sum_{i-1 \in \kappa_{k,\Delta}^\lambda} \lambda = \frac{\lambda}{2} |\kappa_{k,\Delta}^\lambda| > \frac{\lambda\Delta}{4}.
 \end{aligned} \tag{3.52}$$

A si que $\Delta < \frac{8B}{\lambda}$ lo cual contradice la definición de Δ . Por lo tanto el Teorema es verdadero

CAPÍTULO 4

RESULTADOS NUMÉRICOS

Los resultados que se presentan a continuacion fueron tomados del articulo de Dai y Liao [13].

Tabla 4.1. Comparaciones numéricas.

P	Nombre	n	Metodo HS	Metodo (2.8)	Metodo (2.26)
24	Penalty 2	20	2092/6528/3158	1483/4521/2208	476/1486/796
		40	798/2398/1104	1326/4085/1838	342/1081/520
25	Variably	20	Falla	9/42/17	5/28/11
	dimensioned	50	11/67/28*	14/72/27	12/55/24
35	Chebyquad	20	142/450/163	116/380/147	158/504/185
		50	348/1162/418	395/1312/466	349/1156/420
30	Broyden	50	32/103/38	32/103/38	32/103/38
	tridiagonal	500	34/109/41	34/109/41	34/109/41
31	Broyden	50	39/152/70	38/146/66	30/120/56
	banded	500	36/131/56	37/138/60	23/79/32
22	Extended	100	126/373/170	208/629/277	98/292/134
	Powell	1,000	151/448/210	265/793/349	149/433/199
26	Trigonometric	100	54/101/100	58/106/104	54/105/105
		1,000	55/98/98	60/112/111	55/100/100
21	Extended	1,000	24/114/60	23/119/68	23/96/55
	Rosenbrock	10,000	25/117/61	23/119/68	23/96/55
23	Penalty 1	1,000	28/98/74	29/93/69	24/77/57
		10,00	72/278/176	36/138/81	38/136/98

Dai y Liao probaron el método HS, El método (2.8), y el método (2.26) en una estación de trabajo SGI Indigo. La subrutina de línea de búsqueda calcula α_k tal que se tiene la condición de Wolfe fuerte (3.6)-(3.7) con $\delta = 0,01$ y $\sigma = 0,1$. el valor inicial del conjunto α_k es siempre 1. Aunque la línea de búsqueda no siempre pueden garantizar la propiedad de d_k de los tres métodos, las direcciones de búsqueda hacia arriba rara vez ocurren en los experimentos numéricos. en el caso de que una dirección de búsqueda produzca en ascenso, se reinicie el algoritmo ajustando $d_k = -g_k$. Para el método (2.26), se selecciona $t = 0,1$.

Los problemas de prueba provienen de [6] y presentaremos algunos de estos problemas a continuación. Los resultados numéricos de las pruebas se presentan en la Tabla 4.1.

La primera columna P y la segunda columna representan el número y el nombre del problema de [6], respectivamente. Cada uno de los problemas fue probado con dos diferentes valores de n que van desde $n = 20$ a $n = 10000$. Los resultados numéricos son dados en la forma I/F/G donde I, F, G denota el numero de iteraciones, evaluación de las funciones, y evaluación de los gradientes, respectivamente. La condición de parada es

$$\|g_k\| \leq 10^{-6}. \quad (4.1)$$

La iteración también se detiene si el numero de evaluaciones de la función excede 9999, pero se ha notado que esto nunca ocurre. También se termina la iteración si el valor de mejora de la función es demasiado pequeño. Exactamente, las iteraciones son terminadas siempre que

$$\frac{f(x_k) - f(x_{k+1})}{1 + |f(x_k)|} \leq 10^{-16}. \quad (4.2)$$

En este caso, se usa un superíndice "*" mostrando que la iteración es terminada debido a (4.2) pero (4.1) no es satisfecha. Además, se escribe "Failed" si d_k es tan grande que produce un desbordamiento numérico, mientras que el método trata de calcular $f(x_k + d_k)$.

De la Tabla 4.1, se ve que para algunos problemas el método (2.8) realmente lleva a cabo mucho mejor que el método de HS, por ejemplo el problema 25 con $n = 20$ y el problema 23 con $n = 10,000$; mientras que para otros problemas, el método (2.8) no es mejor que el método de HS, por ejemplo el problema 24 con $n = 40$ y el problema 22 con $n = 1000$. En su conjunto, el método (2.8) y el método de HS realizan resultados bastante similares en la prueba de problemas.

Comparando el método (2.26) con el método de HS, se encuentra que hay un gran número de problemas para el cual el método (2.26) supera al método destacado de HS; mientras que para el resto de estos problemas, el método (2.26) y el método HS se realizan de manera muy similar. Por lo tanto, se podrá decir que el método (2.26) es mucho mejor que el método de HS.

CAPÍTULO 5

CÓDIGO Y FUNCIONES DE PRUEBA

Los siguientes códigos son programas software, escritos según la sintaxis de Matlab 7. Fueron realizados por el autor de este trabajo con orientación de su tutor. Ambos comprobaron que los programas funcionan correctamente y que realizan el trabajo para el cual fueron creados. Fueron diseñados para ser ejecutado desde un programa de ventana .fig pero también pueden ser ejecutado desde un archivo.m dándole las entradas correctas.

El diseño del software, es modular y bastante general. No se hizo un único archivo con todas las instrucciones si no un grupo de archivos (módulos) cada uno con una tarea específica.

El archivo GradConjDaiLiao (Gradiente conjugado Dai y Liao) contiene el esqueleto del algoritmo, su estrategia general: Dado un punto inicial, realiza un ciclo iterativo principal, generando la dirección de búsqueda d , la longitud del paso alfa y actualización del iterado. Los cálculos de alfa y beta se realizan en otros archivos, pudiéndose utilizar para este cálculo varias fórmulas. Las fórmulas de beta se programaron en el programa Calculo de Beta, mientras que las fórmulas de alfa requiere un archivo para cada fórmula, el archivo búsqueda se encarga de seleccionar la búsqueda.

Esta función calcula método de gradiente conjugado

```
function
```

```
[solucion, trabajo]=GradConjDaiLiao(x,funcion,CriterioGrad,LaBusqueda,
CriterioBusq,parametros)
% Este programa ejecuta el metodo de gradiente conjugado version

% de dai y Liao
trabajo = struct('Iteraciones',0,'tiempo',0,'Recorridox',[],'Recorridof',
[],'RecorridoBusq',[])
t0 = clock;
k = 0;
[f,gradiente] = feval(funcion,x);
trabajo.Recorridox = [trabajo.Recorridox x];
trabajo.Recorridof = [trabajo.Recorridof f];
d = -1* gradiente
f2=f-100;
auxf=f;
while eval(CriterioGrad)
    f=auxf;
    [alfa,kb] = Busqueda(LaBusqueda,x,d,funcion,CriterioBusq,parametros);
    trabajo.RecorridoBusq = [trabajo.RecorridoBusq kb];
    k = k + 1;
    x2 =x+alfa*d;
    [f2,gradiente2] = feval(funcion,x2);
    auxf=f2;
    s = alfa*d;
    y = gradiente2 - gradiente;

    beta = feval('CalculoDeBeta',1,gradiente2,d,y,s,0.1);

    if (gradiente2'*gradiente)/(gradiente2'*gradiente2) >=1
        d = -1*gradiente2-((parametros(5)*gradiente2'*s)/(d'*y))*d;
```

```
else
    d = -1* gradiente2 + beta*d;
end
x=x2;
gradiente = gradiente2;
trabajo.Recorridox = [trabajo.Recorridox x];
trabajo.Recorridof = [trabajo.Recorridof f];

end

trabajo.tiempo = etime(clock,t0);
trabajo.Iteraciones = k;
solucion = x;

Esta función realiza la búsqueda lineal para el método de gradiente
function [alfa,kb] = Busqueda(LaBusqueda,x,d,funcion,CriterioBusq,parametros)
% Esta funcion realiza la busqueda lineal para el metodo de gradiente
% conjugado
% intervalo = incertidumbre(x,d,funcion);
intervalo = [0 2];
%alfa = intervalo * parametros(6)
%z= x+alfa*d
%[y,gradiente] = eval(funcion,z)
switch LaBusqueda
    case 1 % Busqueda de Wolfe fuerte
        [alfa,kb] = WolfeFuerte4(x,d,funcion,intervalo,CriterioBusq,parametros);
    case 2 % % Busqueda de Armijo
    case 3 % Metodo de Biseccion
        [alfa,kb] =biseccion(x,d,funcion,intervalo,CriterioBusq,parametros);
    case 4 % seccion dorada

    case 5 % Busqueda de Golstein
```

```

        otherwise
            [alfa,kb] = WolfeFuerte(x,d,CriterioBusq,parametros);
end

```

Este programa realiza la búsqueda de Wolfe fuerte

```

function [alfa,kb] =WolfeFuerte4(x,d,funcion,intervalo,CriterioBusq,parametros)
% biseccion
[f,g]=feval(funcion,x);

kb=0;

alfa = intervalo(2);
x2=x+alfa*d;
[f2,g2] = feval(funcion,x2);
condicion1 = (f2<=f+parametros(3)*alfa*g'*d);
condicion2=(abs(g2'*d)<=-1*parametros(4)*g'*d);
condicion3 =(kb <parametros(7));
while ((~condicion1 | ~condicion2) & condicion3)
    if g2'*d >0
        intervalo(2)=alfa;
    else
        intervalo(1)=alfa;
    end
    alfa = (intervalo(1)+intervalo(2))/2;
    x2=x+alfa*d;
    [f2,g2] = feval(funcion,x2);
    kb=kb+1;
    condicion1 = (f2<=f+parametros(3)*alfa*g'*d);
    condicion2=(abs(g2'*d)<=-1*parametros(4)*g'*d);

```

```
    condicion3 =(kb <parametros(7));
end

function [alfa,kb] =seccion_dorada2(x,d,funcion,intervalo,CriterioBusq,parametros)
t=(sqrt(5)-1)/2;
kb=0;
gama=intervalo(1)+(1-t)*(intervalo(2)-intervalo(1));
x1=x+gama*d;
fgama=feval(funcion,x1);
delta=intervalo(1)+t*(intervalo(2)-intervalo(1));
x2=x+delta*d;
fdelta=feval(funcion,x2);
while abs(delta-gama)>parametros(8)
    if fgama>fdelta
        intervalo(1)=gama;
        gama=delta;
        fgama=fdelta;
        delta=intervalo(1)+t*(intervalo(2)-intervalo(1));
        x2=x+delta*d;
        fdelta=feval(funcion,x2);
    else
        intervalo(2)=delta;
        delta=gama;
        fdelta=fgama;
        gama=intervalo(1)+(1-t)*(intervalo(2)-intervalo(1));
        x1=x+gama*d;
        fgama=feval(funcion,x1);
    end
    kb=kb+1;

end

alfa = (intervalo(2)+intervalo(1))/2;
```

Esta función calcula el valor del parámetro Beta que caracteriza la definición de direcciones conjugadas

```
function beta = CalculoDeBeta(caso,g,d,y,s,t)
% Esta funcion calcula el valor del parametro Beta que caracteriza la
% definicion de direcciones conjugadas
```

```
switch caso
    case 1    formula de Hestenes Stiefel
        beta = (g'*y)/(d'*y);
    case 2    formula (2.5)
        beta = g'*(y-t*s)/(d'*y);
    case 3
        beta = max(((g'*y)/(d'*y)),0) - t*(g'*s)/(d'*y);
    case 4
        beta = -1*g - t*((g'*s)/(d'*y))*d;
    otherwise
        beta = max((g'*y)/d'*y,0) - t*(g'*s)/(d'*y);
end
```

Esta función da criterio para el gradiente

```
function CriterioGrad = CriterioG(cual)
%CriterioGrad
switch cual
    case 1
        CriterioGrad = 'norm(gradiente) > parametros(1) & k <= parametros(2)';
    case 2
        CriterioGrad = 'norm(x2-x) > parametros(1) & k <= parametros(2)';
    case 3
```

```
        CriterioGrad = 'f-f2>(1+abs(f))*parametros(8) & k <= parametros(2)';
    otherwise
end
\\
```

```
% definicion de parametros
% parametros(1) guarda a epsilon o se la precision deseada para detener
% parametros(2) Guarda el numero maximo de iteraciones
% parametros(3) guarda el deta para Wolfe
% parametros(4) guarda a sigma para Wolfe
% parametros(5) guarda el parametro t para Dai y Liao
% parametros(6) guarda el porcentaje de reduccion en busquedas tipo Armijo
% parametros(7) numero maximo de busqueda lineales por iteracion
% parametros(8) se usa en criterio de parada  $f(x_k)-f(x_{k+1}) > (1+|f(x_k)|)$ 

% valores por omision
parametros = [0.0005 175 0.01 0.1 0.1 0.5 150 1e-10];
```

Las siguientes son funciones que se usan de prueba

```
function [y,gradiente] = ejemplo01(x)
```

```
% primer ejemplo de prueba para Dai y Liao
```

```
y= (x(1)-4).^2+10*(x(2)-24).^2+100*(x(3)-25).^ 2;
```

```
gradiente = [2.*(x(1)-4); 20.*(x(2)-24); 200.*(x(3)-25)];
```

```
function [y,gradiente] = ejemplo02(x)
```

```
% segundo ejemplo de prueba para Dai y Liao
```

```
y= (x(1)-4).^2+(x(2)-24).^2+(x(3)-25).^ 2;
```

```

gradiente = [2.*(x(1)-4); 2.*(x(2)-24); 2.*(x(3)-25)];

function [y,gradiente]=pruebavariably_dimensioned_function(x)
% funcion de un unico minimo en dos variable polinomio convexo

y=0;
n=length(x);

y=y+(x-1)'*(x-1)+((1:n)*(x-1))^2+((1:n)*(x-1))^4+1;
gradiente=zeros(n,1);
for i=1:n
    gradiente(i)=2*(x(i)-1)+2*i*((1:n)*(x-1))+4*i*(((1:n)*(x-1))^2)*((1:n)*(x-1));
end

function [y,gradiente]=pruebarosenbrock(x)
%funcion valle banana de Rosenbrock generalizado
y=0;
[n1,n2]=size(x);
n=max(n1,n2);
gradiente=[];
if mod(n,2)==0
for ka=1:n/2
    y=y+100*(x(2*ka)-x(2*ka-1))^2+(1-x(2*ka-1))^2;
end

for kb=1:n/2
    gradiente=[gradiente;-400*(x(2*kb)-x(2*kb-1))^2*x(2*kb-1)-
    2*(1-x(2*kb-1));200*(x(2*kb)-x(2*kb-1)^2)];
end
else
    mensaje=strvcat('punto con dimension no adecuada',

```

```
'debe dar un vector con dimension par ');
titulo='ERROR!';
errorldlg(mensaje,titulo)
y=NaN;
gradiente=NaN;
end

% una corrida de prueba01
CriterioGrad = CriterioG(1);
%funcion = 'pruebarosenbrock';
%funcion = 'pruebasingpowell'
%funcion = 'rosenbrock1'
%funcion = 'trigonom'
funcion = 'pruebavariably_dimensioned_function'
%funcion = 'trigonom'
%funcion = 'ejemplo01';
%funcion = 'ejemplo04'
%x=[1/4 1/4 1/4 1/4] '% x de la trigonometrica;
x=[5/10 4/10 3/10 2/10 0] '%x de funcion variably dimencion
%x = [-1.2;1;-1.2;1;-1.2;1;-1.2;1;-1.2;1;-1.2;1];% x de la funcion rosenbrock
%x = [3 -1 0 1] '%x de lafuncion powell singular
%x = [-1.2 1.2]'
%x=[1 21 21]'
%x=[1 1 1]'
%x=[1 1]'
DefinicionParametros;
LaBusqueda = 3;
CriterioBusq = 1;
```

```
[solucion, trabajo]=GradConjDaiLiao(x,funcion,CriterioGrad,LaBusqueda,CriterioBusq,  
parametros)
```

```
end
```

A continuación se presenta una imagen de la ventana .fig desde la cual se puede correr el algoritmo de Gradiente Conjugado de Dai y Liao.

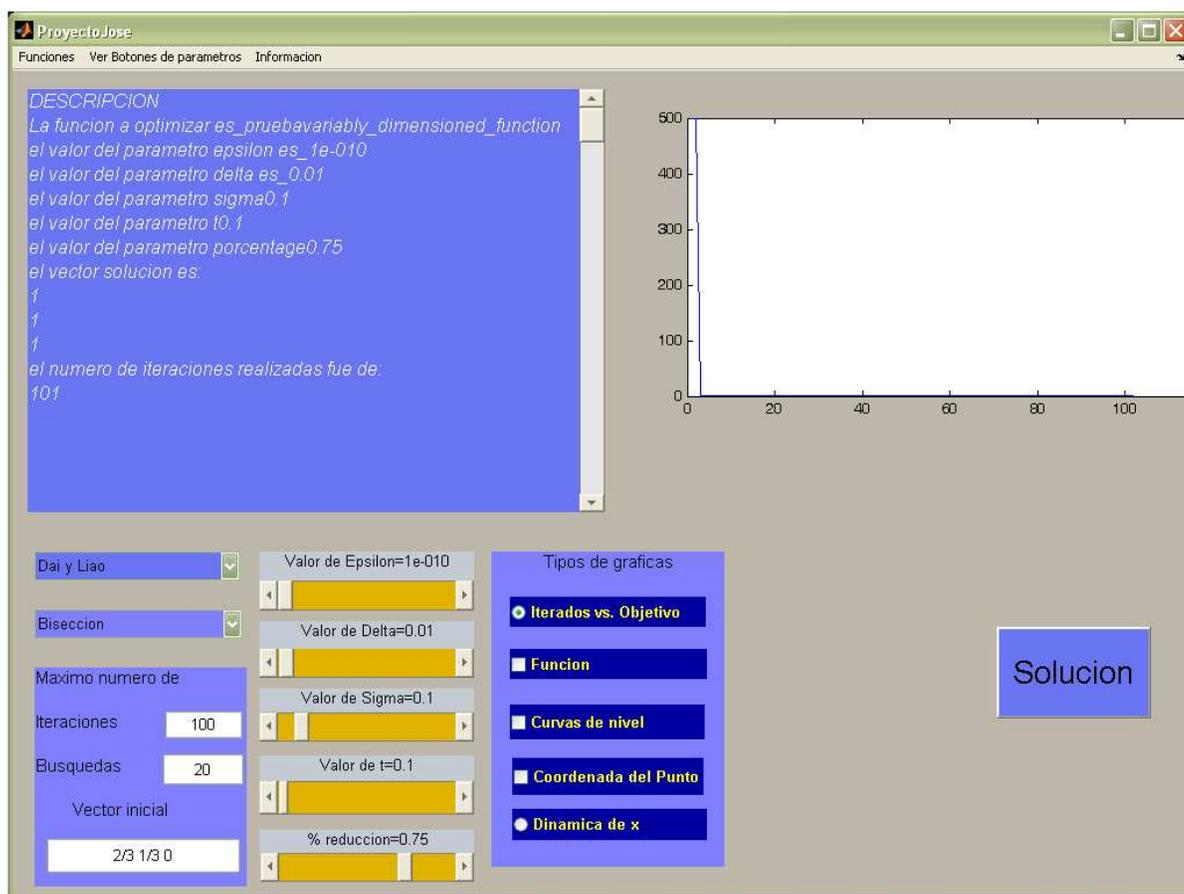


Figura 5.1: Imagen del programa de gradiente conjugado

CAPÍTULO 6

CONCLUSIONES Y RECOMENDACIONES

Conclusiones:

El método de Gradiente Conjugado Dai y Liao [13] es al menos tan efectivo como el método de Hestenes y Stiefel [4].

Se da una condición de conjugancia equivalente a la H conjugancia.

El método de Dai y Liao es globalmente convergente.

Se logro probar el funcionamiento en la practica del método de Dai y Liao obteniendo los resultados esperados.

Recomendaciones:

Se recomienda experimentar con el método para determinar valores convenientes de los parámetros δ , σ y t de acuerdo con las características de la función f .

Se recomienda hacer prueba del método con otras funciones.

Se recomienda comparar, en forma experimental, este método con otros método de Gradiente Conjugado.

REFERENCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- [1] Dai YH(1999) Convergence properties of nonlinear conjugate gradient methods(II). Research Report AMSS-1999-082, Academy of Mathematics and Systems Sciences(submitted to SIAM J Optim)
- [2] Dai YH, Han JY, Liu GH, Sun DF, Yin HX, Yuan Y (1999) Convergence properties of nonlinear conjugate gradient methods. SIAM J Optim 10(2):348-358
- [3] Gilbert JC,Nocedal J(1992), Global convergence properties of conjugate gradient methods for optimization. SIAM J Optim 2(1):21-42
- [4] Hestenes MR, Stiefel EL(1952), Methods of conjugate gradients for solving linear systems. J Res Nat Bur Standards 49(5):409-436
- [5] Jorge Nocedal Stephen J. Wright , Numerical Optimization Springer pp 101
- [6] Liao LZ, Dai YH (1999), A time delay neural network model for unconstrained optimization(submitted)
- [7] Moré JJ, Garbow BS, Hillstom KE (1981) Testing unconstrained optimization software. ACM trans Math software 7:17-41
- [8] Nazareth JL (1977), A conjugate direction algorithm without line searches. J Optim Theory Appl 23(3):373-387
- [9] Polak E, Ribiere G (1969), Note sur la convergence de méthodes directions conjuguées. Rev Francaise Inform Rech Opér 16:35-43
- [10] polyak BT (1969)The conjugate gradient method in extreme problems. USSR Comp Math Math Phys 9:94-112
- [11] Powell MJD (1984) Nonconvex minimization calculations and the conjugate gradient method. In: Lecture Notes in Mathematics 1066. Springer-Verlag, Berlin, pp 122-141

- [12] Yuan Y, Stoer J (1995) A subspace study on conjugate gradient algorithms. *Z angew Math Mech* 75(11):69-77
- [13] Y.-H. Dai¹ and L.-Z. Liao² (2001) New Conjugacy Conditions and Related Nonlinear Conjugate Gradient Methods*. In: *Applied Mathematics and Optimization*, Springer-Verlag New York Inc, *Appl Math Optim* 43:87-101 (2001)
- [14] Zoutendijk G (1970) Nonlinear programming, computational methods. In: *Integer and Nonlinear Programming* (Abadie J ed). North-Holland, Amsterdam, pp 37-86